

***Calcul du champ démagnétisant dans un
matériau magnétique de géométrie quelconque
par une technique de transformée de Fourier et
la méthode du domaine fictif***

A. Bagnérés, S. Durbiano

N° 3289

Octobre 1997

_____ THÈME 4 _____

 ***apport
de recherche***


Calcul du champ démagnétisant dans un matériau
magnétique de géométrie quelconque par une technique
de transformée de Fourier et la méthode du domaine
fictif

A. Bagnérés, S. Durbiano

Thème 4 — Simulation et optimisation
de systèmes complexes
Projet IDOPT

Rapport de recherche n 3289 — Octobre 1997 — 33 pages

Résumé : On utilise une technique de transformée de Fourier rapide, aussi appelée algorithme de “0-padding”, pour calculer le champ démagnétisant dans un matériau magnétique de géométrie quelconque en dimension 3.

Après discrétisation, on peut écrire le champ comme le produit de convolution d’un noyau, le tenseur démagnétisant, par l’aimantation. En continu, on sait que la transformée de Fourier du produit de convolution de deux fonctions est égale au produit de leur transformée de Fourier. Dans le cas discret, on a un résultat similaire avec des fonctions périodiques et des transformées de Fourier discrètes. Il ne peut pas s’appliquer directement pour le calcul du champ démagnétisant, les opérandes du produit de convolution n’étant pas, à priori, périodiques. La technique par transformée de Fourier consiste, dans un premier temps, à placer le noyau et l’aimantation dans un contexte périodique. On calcule, ensuite, les coefficients de Fourier des nouvelles variables par transformations de Fourier discrètes, et ceux du champ démagnétisant en faisant le produit de ces coefficients. Ce dernier est alors obtenu par transformations de Fourier discrètes inverses.

On présente l’algorithme et démontre qu’il donne le résultat attendu.

Des calculs de ce type ont déjà été publiés pour des matériaux de géométrie cubique ou parallélépipédique [1, 5, 10, 17, 18]. On généralise la technique au calcul dans des matériaux de géométrie quelconque. Le matériau est plongé dans une boîte d’air parallélépipédique : le domaine fictif, et la méthode est adaptée.

Ce nouvel algorithme présente donc la qualité première de l’algorithme initial : son efficacité - la complexité est en $O(N \log N)$ pour N noeuds de maillage au lieu de N^2 lorsqu’on fait le produit directement - avec, en plus, de la souplesse pour le choix de la géométrie.

On donne les résultats obtenus sur calculateur parallèle, le Cray T3E, pour un cube, une sphère et un pôle de tête d’enregistrement magnétique.

Mots-clé : Champ démagnétisant, micromagnétisme, produit de convolution.

(Abstract: pto)

Calculation of the demagnetizing field in a magnetic material of arbitrary shape by a Fourier transform technic and the fictive domain method

Abstract: A Fast Fourier Transform (FFT) technique, also called the “0-padding” algorithm, is used to compute the demagnetizing field in a magnetic material of arbitrary shape.

After discretisation of the variables, the field can be written as the convolution product of a kernel, the demagnetizing tensor, by the magnetization. In the continuous case, we know that the Fourier transform of the convolution product of two functions is equal to the product of their individual Fourier transforms. There is a similar result for periodic functions and discrete Fourier transforms, but it cannot be applied directly for the computation of the demagnetizing field as the operands of the convolution product are not periodic. The first step of this FFT technique is to place both the kernel and the magnetization in a periodic frame. We calculate the Fourier coefficients of the new variables by doing FFTs, and those of the demagnetizing field by a simple product of these coefficients. The field is finally obtained by inverse discrete Fourier transform.

We prove that the algorithm gives the expected result.

Demagnetizing field calculations of this type have already been published for material of parallelepipedic and cubic shape, [1, 5, 10, 17, 18]. This work is a generalization for material of arbitrary shape. The magnetic body is plunged in a parallelepipedic box containing air: the fictive domain, and the algorithm is adapted. The new technique has the first quality of the initial one : the number of computations is of order $O(N \log N)$ for N mesh points instead of $O(N^2)$ for the direct convolution product, with some flexibility in the choice of the geometry of the magnetic body, as well.

We present results for a cube, a sphere, and a piece of a magnetic recording head, obtained on a Cray T3D parallel computer.

Key-words: Demagnetizing field, micromagnetic calculation, “0-padding” algorithm, cyclic convolution, fast Fourier transform.

Table des matières

1	Introduction	5
2	Le problème physique	6
3	Le calcul numérique du champ démagnétisant	7
3.1	Introduction	7
3.2	Le calcul de la matrice noyau	8
3.3	L'algorithme de "0-padding":	10
3.3.1	L'algorithme	11
3.3.2	Preuve	12
3.3.3	Complexité	13
4	L'implémentation	13
4.1	L'implémentation en séquentiel	13
4.2	La parallélisation du code	14
5	Les résultats numériques:	14
5.1	Cas test numéro 1: aimantation uniforme dans un cube.	15
5.2	Cas test numéro 2: cube entouré d'une couche d'air	16
5.2.1	Résultats avec un maillage $16 \times 16 \times 16$	16
5.2.2	Résultats avec un maillage $64 \times 64 \times 64$	17
5.3	Cas test numéro 3: sphère aimantée uniformément.	18
5.3.1	Résultats	18
5.3.2	Temps de calcul	23
5.4	Cas test numéro 4: maillage de la sphère en éléments parallélépipédiques . . .	25
5.5	Cas test numéro 5: aimantation uniforme dans un pôle de tête de lecture. . .	25
6	Conclusion	29
7	Annexe: calcul des coefficients d'interaction	29
7.1	Plaques parallèles	29
7.2	Plaques orthogonales	31

1 Introduction

Les matériaux ferromagnétiques présentent une aimantation spontanée \vec{M} de norme constante et de direction pouvant varier. L'aimantation induit un champ, le champ démagnétisant, présent dans tout l'espace et que l'on souhaite déterminer dans le matériau. Le calcul étant à effectuer de nombreuses fois, - pour la résolution d'équations évolutives, par exemple - il est nécessaire que l'algorithme soit efficace.

Pour un matériau de géométrie parallélépipédique, on subdivise le domaine d'étude en mailles régulières. L'aimantation est supposée constante par maille. Si $S = \bigcup_{I=1,\dots,K} S_I$ est l'union des interfaces entre éléments du maillage, avec l'hypothèse \vec{m} constante par maille, l'énergie démagnétisante discrète s'écrit :

$$E_D(\vec{m}) = \frac{M_s^2}{2} \int_S \int_{S'} \frac{\vec{m}(r) \cdot \vec{n}(r) \times \vec{m}(r') \cdot \vec{n}(r')}{\|r - r'\|} dS' dS \quad (1)$$

$$= \frac{M_s^2}{2} \sum_{I=1}^K \sum_{J=1}^K \sigma_I \sigma_J \int_{S_I} \int_{S_J} \frac{1}{\|r - r'\|} dS' dS \quad (2)$$

où $\sigma_I = \sigma_{i,j,k} = \vec{m} \cdot \vec{n}|_{S_I}$ sont les "charges magnétiques surfaciques". Le champ démagnétisant moyen sur chaque élément de maillage s'obtient alors en prenant la dérivée variationnelle de l'énergie démagnétisante par rapport à \vec{m} :

$$\vec{H}_D = -\frac{\delta E_D}{\delta \vec{m}}.$$

Chaque composante de ce champ moyen s'écrit comme une somme de produits de convolution d'un noyau K par la variable d'aimantation.

On utilise une technique de transformée de Fourier rapide, aussi appelée algorithme de "0-padding" [4], pour effectuer ces produits de convolution. D'après le théorème de convolution, la transformée de Fourier du produit de convolution de deux fonctions est égale au produit de leur transformée de Fourier. L'algorithme de 0-padding s'inspire de ce théorème. Ici, on a à faire des transformées discrètes. Les variables, qui sont non périodiques initialement, sont placées dans un contexte périodique. Les effets de périodicité sont neutralisés en doublant la zone de calcul dans toutes les directions (cela revient à prendre une boîte huit fois plus grande en dimension 3) et en initialisant la variable d'aimantation à zéro dans les régions ajoutées. Les coefficients de Fourier de \vec{H}_D sont alors obtenus en faisant un simple produit des coefficients de la nouvelle variable d'aimantation par ceux d'un "noyau".

La complexité du calcul passe de $O(N^2)$, dans le cas du calcul direct du produit de convolution, à $O(N \log(N))$ dans le cas de l'algorithme de 0-padding, d'où un gain appréciable.

D'abord vu comme une méthode de transformation pour résoudre l'équation de Poisson pour des systèmes isolés [7, 4], et également présenté dans [11] pour calculer le produit de convolution de deux fonctions non périodiques dont une est à support compact, l'algorithme a été utilisé plus récemment pour calculer le champ démagnétisant dans un matériau ferromagnétique de géométrie cubique ou parallélépipédique [1, 5, 10, 17, 18]. On l'applique ici

au calcul du champ dans des matériaux de géométrie quelconque. Le domaine d'étude est plongé dans une boîte parallélépipédique maillée régulièrement. L'algorithme s'applique directement au nouveau domaine si la variable d'aimantation est mise à zéro lorsque le centre de la maille se situe dans la partie d'air.

On a écrit un code pour le Cray T3E, machine parallèle de type MIMD à mémoire distribuée. Le programme a été testé sur un cube, une sphère et une pièce de tête d'enregistrement. On donne les résultats dans tous les cas. Pour le cube, on a pu les comparer avec des résultats obtenus avec le logiciel Flux3D. Dans le cas de la sphère, on connaît la valeur analytique du champ que l'on compare également aux résultats numériques.

Dans le paragraphe 1, on donne les équations de la physique liant l'aimantation et le champ démagnétisant. Le paragraphe 2 décrit l'algorithme de résolution. On donne en particulier la valeur des intégrales :

$$W_{IJ} = \int_{S_I} \int_{S_J} \frac{1}{\|r - r'\|} dS' dS$$

constituant le noyau. Puis, on décrit l'algorithme de "0-padding" et on démontre qu'il donne le résultat souhaité. Le paragraphe 3 est consacré à la description des structures de données, de l'algorithme séquentiel et de l'implémentation en parallèle.

Les résultats de calculs sont présentés au paragraphe 4.

2 Le problème physique

À l'intérieur des matériaux ferromagnétiques, on observe des régions où \vec{M} a une même orientation. Ce sont les domaines. Les transitions entre domaines sont d'épaisseur très fine. On les appelle les parois.

Soient M_s le coefficient de saturation magnétique, \vec{m} l'aimantation normalisée : $\vec{M} = M_s \vec{m}$ et \vec{m}^* son prolongement par $\vec{0}$ en dehors du matériau. L'aimantation induit un champ \vec{H}_D , le champ démagnétisant, présent dans tout l'espace. Il vérifie les équations issues des équations de Maxwell suivantes (en unité CGS) :

$$\operatorname{div} \vec{H}_D = -4\pi \operatorname{div} \vec{m}^* \quad (3)$$

$$\operatorname{rot} \vec{H}_D = \vec{0} \quad (4)$$

$$\vec{H}_D \in L^2(\mathbb{R}^3) \quad (5)$$

On déduit de ces équations qu'il existe un potentiel scalaire ϕ vérifiant :

$$\vec{\nabla} \phi = \vec{H}_D \quad (6)$$

$$\Delta \phi = -4\pi \operatorname{div} \vec{m}^* \quad (7)$$

$$\vec{\nabla} \phi \in L^2(\mathbb{R}^3) \quad (8)$$

La seconde équation admet pour solution [16] :

$$\phi = g * \operatorname{div} \vec{m}^* \quad \text{où} \quad g(r) = \frac{1}{\|r\|} \quad (9)$$

On peut écrire l'énergie démagnétisante sous l'une des trois formes suivantes :

$$E_D(\vec{m}) = -\frac{M_s^2}{2} \int_V \vec{m} \cdot \vec{H}_D dV \quad (10)$$

$$= \frac{M_s^2}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{\text{div } \vec{m}(r) \cdot \text{div } \vec{m}(r')}{\|r - r'\|} dV dV' \quad (11)$$

$$= \frac{M_s^2}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \vec{H}_D^2 dV \quad (12)$$

3 Le calcul numérique du champ démagnétisant

3.1 Introduction

Pour le calcul numérique de \vec{H}_D , on discrétise la deuxième formulation de l'énergie démagnétisante. On suppose, dans un premier temps, que le matériau est un parallélépipède que l'on subdivise en sous-parallélépipèdes de tailles égales. On suppose que \vec{M} est constante par maille. Cette hypothèse, par rapport à des calculs plus complexes [12], a l'avantage de faire intervenir des calculs simples à mettre en oeuvre. On pense qu'elle est d'une précision suffisante pour nos calculs.

L'énergie démagnétisante discrète vaut alors :

$$E_D(\vec{m}) = \frac{M_s^2}{2} \int_S \int_{S'} \frac{\vec{m}(r) \cdot \vec{n}(r) \times \vec{m}(r') \cdot \vec{n}(r')}{\|r - r'\|} dS' dS \quad (13)$$

$$= \frac{M_s^2}{2} \sum_{I=1}^K \sum_{J=1}^K \int_{S_I} \int_{S_J} \frac{\sigma_I(r) \sigma_J(r')}{\|r - r'\|} dS' dS \quad (14)$$

où les surfaces S_I , $I = 1, \dots, K$ sont les interfaces entre parallélépipèdes élémentaires. Ils sont au nombre de $K = 3LMN + LM + MN + LN$ s'il y a respectivement L , M , N pas de subdivisions dans chacune des directions ox , oy et oz . Pour une interface S_I horizontale, $\sigma_I = \sigma_{i,j,k}^{xy} = (\vec{m}_{i,j,k-1} - \vec{m}_{i,j,k}) \cdot \vec{n}_z$, $i = 1, \dots, L$, $j = 1, \dots, M$ et $k = 1, \dots, N + 1$, quantité qui est constante par sous-plaque et qu'on peut donc sortir des intégrales. Les "charges" pour les deux autres types d'interfaces, les interfaces verticales parallèles aux plans xoz et yoz , s'écrivent de façon similaire.

Le champ démagnétisant moyen sur chaque élément de maillage s'obtient alors en prenant la dérivée variationnelle de l'énergie démagnétisante par rapport à \vec{m} :

$$\vec{H}_D = -\frac{\delta E_D}{\delta \vec{m}}.$$

Il s'écrit comme le produit de convolution d'un noyau K , à déterminer, par la variable d'aimantation.

Pour un matériau de géométrie quelconque, le calcul se fait par la technique de domaine fictif. On plonge le matériau dans un parallélépipède que l'on maille, à nouveau, régulièrement. Les coefficients d'interaction peuvent alors être calculés comme précédemment. Par

contre, la valeur de la variable d'aimantation est fixée à $(0,0,0)^T$ si le centre de la maille est dans la partie externe, et à sa valeur dans le matériau, sinon.

On calcule numériquement le produit de convolution par la technique de "0-padding".

3.2 Le calcul de la matrice noyau

Pour calculer \vec{H}_D , il nous faut donc calculer les coefficients d'interaction entre plaques

$$W_{IJ} = \int_{S_I} \int_{S_J} \frac{1}{\|r - r'\|} dS' dS.$$

Ils sont donnés sans détails de calcul dans la référence [5]. De par la géométrie du maillage, il y a seulement deux types de coefficients d'interaction à calculer : les coefficients pour des plaques parallèles entre elles ou orthogonales.

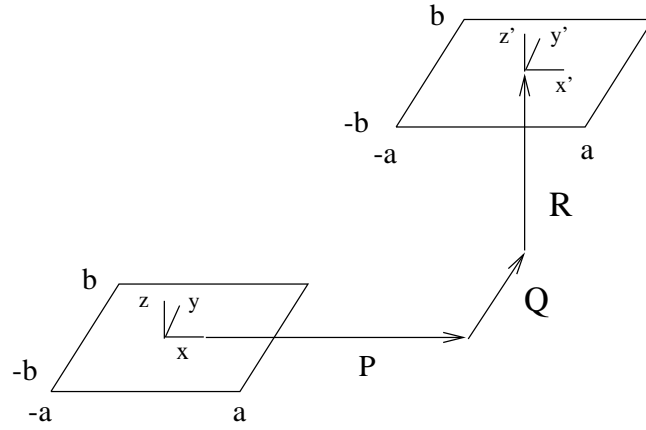


Figure 3.1 : Représentation de plaques parallèles entre elles. On donne les coordonnées des bords de chaque plaque par rapport au repère local $(0, x, y, z)$ ou $(0', x', y', z')$.

Soient (ox, oy, oz) et $(o'x', o'y', o'z')$ les repères locaux centrés au centre de chacune des plaques. Pour des plaques parallèles entre elles et horizontales, séparées par une distance $\sqrt{P^2 + Q^2 + R^2}$, où P, Q et R sont les longueurs entre centres de plaques dans les directions ox , oy et oz , respectivement, le coefficient d'interaction à calculer est :

$$W^{xyxy}(P, Q, R) = \int_{-b}^b \int_{-a}^a \int_{-b}^b \int_{-a}^a \frac{1}{\sqrt{(P - x + x')^2 + (Q - y + y')^2 + R^2}} dx dy dx' dy'$$

C'est une intégrale quadruple de valeur :

$$W^{xyxy}(P, Q, R) = [[[[f(P - x + x', Q - y + y', R)]_{x=-a}^{x=a}]_{y=-b}^{y=b}]_{x'=-a}^{x'=a}]_{y'=-b}^{y'=b}$$

où

$$f(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{2}\xi(\eta^2 - \zeta^2)L_\xi + \frac{1}{2}\eta(\xi^2 - \zeta^2)L_\eta - \xi\eta A_\zeta + \frac{1}{6}(3\zeta^2 - r^2)r \quad (15)$$

avec

$$r = \sqrt{\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2}, \quad L_\xi = \ln(r + \xi), \quad L_\eta = \ln(r + \eta) \quad \text{et} \quad A_\zeta = \zeta \arctan\left(\frac{\xi\eta}{\zeta r}\right).$$

Le détail de son calcul est donné en annexe.

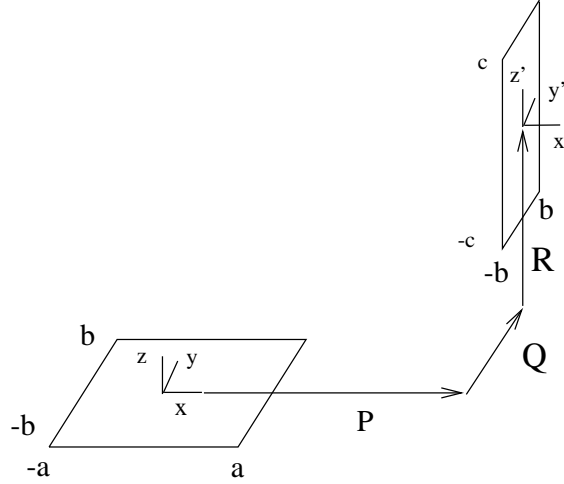


Figure 3.2 : Représentation de plaques perpendiculaires entre elles. On donne les coordonnées des bords de chaque plaque par rapport au repère local $(0, x, y, z)$ et $(0', x', y', z')$.

Pour des plaques orthogonales entre elles, une horizontale, l'autre verticale parallèle au plan $yo z$, le coefficient d'interaction est :

$$W^{xyyz}(P, Q, R) = [[[[g(P - x, Q - y + y', R + z')]]_{x=-a}^{x=a}]_{y=-b}^{y=b}]_{y'=-b}^{y'=b}]_{z=-c}^{z=c}$$

où

$$g(\xi, \eta, \zeta) = L_\eta \xi \eta \zeta + \frac{1}{6}\xi(3\eta^2 - \xi^2)L_\zeta + \frac{1}{6}\zeta(3\eta^2 - \xi^2)L_\xi - \frac{1}{6}\eta(A_\eta \eta + 3A_\xi \xi + 3A_\zeta \zeta) - \frac{1}{3}r\xi\zeta. \quad (16)$$

Attention : les formules pour P, Q et R ne sont pas les mêmes que précédemment [5].

Les coefficients W^{xxzz} , W^{yyzz} , W^{xyxz} et W^{xzyz} s'obtiennent par permutation circulaire des variables. De plus, on a

$$W^{aabb}(P, Q, R) = W^{bbaa}(-P, -Q, -R) \quad aa, bb \in \{xy, xz, yz\}. \quad (17)$$

Soient σ_{ijk}^{xy} , σ_{ijk}^{yz} , respectivement σ_{ijk}^{xz} , les charges surfaciques d'une plaque $I = (i, j, k)$ d'orientation respective xoy , $yozy$, xoz , l'énergie démagnétisante vaut alors :

$$\begin{aligned}
 E_D = & M_s^2 \left[\frac{1}{2} \left(\sum_{i,j,k=1}^{l,m,n+1} \sigma_{i,j,k}^{xy} \sum_{i',j',k'=1}^{l,m,n+1} \sigma_{i',j',k'}^{xy} W_{i-i',j-j',k-k'}^{xyxy} + \sum_{i,j,k=1}^{l+1,m,n} \sigma_{i,j,k}^{yz} \sum_{i',j',k'=1}^{l+1,m,n} \sigma_{i',j',k'}^{yz} W_{i-i',j-j',k-k'}^{yzyz} \right. \right. \\
 & + \sum_{i,j,k=1}^{l,m+1,n} \sigma_{i,j,k}^{xz} \sum_{i',j',k'=1}^{l,m+1,n} \sigma_{i',j',k'}^{xz} W_{i-i',j-j',k-k'}^{xzxz} \left. \right) \\
 & + \sum_{i,j,k=1}^{l,m,n+1} \sigma_{i,j,k}^{xy} \sum_{i',j',k'=1}^{l+1,m,n} \sigma_{i',j',k'}^{yz} W_{i-i',j-j',k-k'}^{xyyz} + \sum_{i,j,k=1}^{l,m,n+1} \sigma_{i,j,k}^{xy} \sum_{i',j',k'=1}^{l,m+1,n} \sigma_{i',j',k'}^{xz} W_{i-i',j-j',k-k'}^{xyxz} \\
 & + \sum_{i,j,k=1}^{l+1,m,n} \sigma_{i,j,k}^{yz} \sum_{i',j',k'=1}^{l,m+1,n} \sigma_{i',j',k'}^{xz} W_{i-i',j-j',k-k'}^{yzzx} \left. \right]
 \end{aligned}$$

et le champ démagnétisant :

$$\begin{pmatrix} H_D^x \\ H_D^y \\ H_D^z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K^{xx} & K^{xy} & K^{xz} \\ K^{yx} & K^{yy} & K^{yz} \\ K^{zx} & K^{zy} & K^{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_x \\ m_y \\ m_z \end{pmatrix}$$

où les éléments de la matrice noyau sont :

$$\begin{aligned}
 K_{Ii,Jj,Kk}^{xx} &= 2W_{I-i,J-j,K-k}^{yzyz} - W_{I-i-1,J-j,K-k}^{yzyz} - W_{I+1-i,J-j,K-k}^{yzyz} \\
 K_{Ii,Jj,Kk}^{xy} &= W_{I+1-i,J-j-1,K-k}^{yzxz} + W_{I-i,J-j,K-k}^{yzxz} - W_{I+1-i,J-j,K-k}^{yzxz} - W_{I-i,J-j-1,K-k}^{yzxz} \\
 K_{Ii,Jj,Kk}^{xz} &= W_{I+1-i,J-j,K-k-1}^{yzxy} + W_{I-i,J-j,K-k}^{yzxy} - W_{I+1-i,J-j,K-k}^{yzxy} - W_{I-i,J-j,K-k-1}^{yzxy} \\
 K_{Ii,Jj,Kk}^{yy} &= 2W_{I-i,J-j,K-k}^{xzxz} - W_{I-i,J-j-1,K-k}^{xzxz} - W_{I-i,J+1-j,K-k}^{xzxz} \\
 K_{Ii,Jj,Kk}^{yz} &= W_{I-i,J+1-j,K-k-1}^{yzxz} + W_{I-i,J-j,K-k}^{yzxz} - W_{I-i,J+1-j,K-k}^{yzxz} - W_{I-i,J-j-1,K-k-1}^{yzxz} \\
 K_{Ii,Jj,Kk}^{zz} &= 2W_{I-i,J-j,K-k}^{xyxy} - W_{I-i,J-j,K-k-1}^{xyxy} - W_{I-i,J-j,K+1-k}^{xyxy}
 \end{aligned}$$

On retrouve les autres coefficients grâce à la formule (17).

Un calcul du noyau différent est donné dans l'article de Newell et al. [9]. Il consiste à considérer non plus des interactions entre plaques mais des interactions de paires de plaques ou cellules. Si les formules finales diffèrent, le résultat est identique.

3.3 L'algorithme de "0-padding":

On va, tout d'abord, présenter la technique dans un cadre général. On veut calculer numériquement le produit de convolution d'une fonction de Green g par une distribution ρ

à support compact I :

$$\phi(x) = \int_I g(x' - x) \rho(x') dx'. \quad (18)$$

En continu, le calcul se fait simplement en utilisant les transformées de Fourier :

- g se transforme en \hat{g} ,
- ρ en $\hat{\rho}$,
- ϕ est alors la transformée de Fourier inverse du produit $\hat{\phi} = \hat{g} \cdot \hat{\rho}$.

Le principe est le même si on prend les transformées de Fourier discrètes des fonctions à ceci près que les fonctions doivent être périodiques. Ce n'est pas le cas ici. Cette difficulté est contournée en doublant le domaine d'étude dans chacune des directions de l'espace et en prenant les fonctions périodiques associées à g tronquée et ρ .

Dans la suite de ce paragraphe, nous allons présenter l'algorithme en détail puis démontrer qu'il donne le résultat attendu.

3.3.1 L'algorithme

Pour simplifier les notations, on va raisonner en dimension 1. I est un intervalle de \mathbb{R} que l'on subdivise en N mailles $\{I_i\}$ de taille égale H . Pour la discrétisation de l'intégrale de convolution, nous avons différents choix possibles. En voici deux :

- soit on prend un échantillonnage de ρ : $\rho_1 = \coprod \rho$ où \coprod est le peigne de dirac $\coprod(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - n)$. C'est ce qui est fait dans l'article de Eastwood & al. [4].
- soit on suppose ρ constante par maille. Notons x_i la coordonnée au centre la maille I_i , $G_i = \int_{I_i} g(x') dx'$ et $\rho_i = \rho(x_i)$. Pour $i = 1, \dots, N$, ϕ_i , la valeur de ϕ au point x_i s'écrit donc :

$$\phi_i = \sum_{i'=1}^N \rho_{i'} G_{i-i'}.$$

C'est ce que nous faisons pour le calcul de \vec{H}_D .

Pour $i = 1, \dots, N$, on prend :

$$\underline{\rho}(x_i) = \begin{cases} \rho(x_i) & 0 \leq i \leq N-1, \\ 0 & N \leq i \leq 2N-1 \end{cases} \quad (19)$$

$$\underline{G}(x_i) = G(x_i) \quad -N \leq i \leq N-1 \quad (20)$$

$$\underline{\rho}(x + 2nNH) = \underline{\rho}(x) \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (21)$$

$$\underline{G}(x + 2nNH) = \underline{G}(x) \quad (22)$$

L'algorithme consiste à calculer :

- les transformées de Fourier discrètes des échantillons périodiques $\{\underline{G}_i\}_{i=1, \dots, 2N}$ et $\{\underline{\rho}_i\}_{i=1, \dots, 2N}$: $\{\hat{G}_i\}_{i=1, \dots, 2N}$ et $\{\hat{\rho}_i\}_{i=1, \dots, 2N}$,
- les produits $\hat{G}_i \cdot \hat{\rho}_i$, pour $i = 1, \dots, 2N$,

– la transformée de Fourier inverse de $\{\hat{G}_i \cdot \hat{\rho}_i\}_{i=1, \dots, 2N}$,

Le résultat du calcul pour $i = 1, \dots, N$ donne le produit de convolution (18).

3.3.2 Preuve

La transformée de Fourier discrète de $\underline{\rho}$ et \underline{G} est :

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_n &= \frac{1}{2N} \sum_{q=0}^{2N-1} \rho_q \exp\left(-2i\pi \frac{nq}{2N}\right) \\ \hat{G}_n &= \frac{1}{2N} \sum_{j=0}^{2N-1} G_j \exp\left(-2i\pi \frac{nj}{2N}\right) \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{j=-q}^{2N-q-1} G_j \exp\left(-2i\pi \frac{nj}{2N}\right) \quad \text{car } \underline{G} \text{ est périodique} \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{j=0}^{2N-1} G_{j-q} \exp\left(-2i\pi \frac{n(j-q)}{2N}\right)\end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned}2N \hat{G}_n \hat{\rho}_n &= \frac{1}{2N} \sum_{q=0}^{2N-1} \sum_{j=0}^{2N-1} \rho_q G_{j-q} \exp\left(-2i\pi \frac{nj}{2N}\right) \\ &= \hat{C}_n\end{aligned}$$

La transformée de Fourier inverse de $\{\hat{C}_n\}_{n=1, \dots, 2N}$ est :

$$\begin{aligned}C_k &= \sum_{n=0}^{2N-1} \hat{C}_n \exp\left(-2i\pi \frac{nk}{2N}\right) \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{n=0}^{2N-1} \left(\sum_{q=0}^{2N-1} \sum_{j=0}^{2N-1} \rho_q G_{j-q} \exp\left(-2i\pi \frac{nj}{2N}\right) \right) \exp\left(2i\pi \frac{nk}{2N}\right) \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{q=0}^{2N-1} \sum_{j=0}^{2N-1} \rho_q G_{j-q} \sum_{n=0}^{2N-1} \exp\left(-2i\pi \frac{n(j-k)}{2N}\right)\end{aligned}$$

Or

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{2N-1} \exp\left(-2i\pi \frac{n(j-k)}{2N}\right) &= 0 \quad \text{si } (j \neq k) \\ &= 2N \quad \text{sinon}\end{aligned}$$

Ce qui conduit à

$$C_k = \sum_{q=0}^{2N-1} \rho_q G_{k-q} \quad \forall k = 0, \dots, 2N-1.$$

D'où, pour $k = 0, \dots, N-1$,

$$C_k = \sum_{q=0}^{N-1} \rho_q G_{k-q}.$$

Ce qui prouve que l'algorithme donne le résultat attendu :

$$\phi(x_k) = C_k$$

lorsque le maillage est suffisamment fin.

3.3.3 Complexité

Les étapes 1 et 3 sont en $N \log(N)$, l'étape 2 en N .

4 L'implémentation

4.1 L'implémentation en séquentiel

Pour simplifier les notations, plaçons-nous en dimension un. Le noyau et l'aimantation sont stockés dans des tableaux de tailles $2N$ de la façon suivante :

K	0	1	...	N-2	N-1	*	-N+1	-N+2	...	-2	-1
M	0	1	...	N-2	N-1	*	*	*	...	*	*

Les caractères * représentent les zéros ajoutés. L'algorithme de 0-padding comporte trois étapes :

- 1 - Calcul des transformées de Fourier discrètes des variables de taille $2N$, K et M .
- 2 - Calcul du produit terme à terme de \hat{K} et \hat{M} . ($2N$ produits à effectuer). On obtient \hat{H}_D .
- 3 - Calcul de la transformée de Fourier discrète inverse de \hat{H}_D pour obtenir \vec{H}_D sur $0, \dots, N-1$.

Le stockage et l'algorithme se généralisent de façon triviale à la dimension 3.

Remarque: Nous avons également programmé le calcul du produit de convolution en séquentiel par la méthode directe et comparé les résultats avec ceux obtenus avec la technique de “0-padding” sur des maillages comprenant jusqu’à $24 \times 24 \times 24$ éléments. Les résultats sont identiques à la précision de la machine près. La FFT n’introduit donc pas d’erreurs numériques supplémentaires.

4.2 La parallélisation du code

On a porté le code séquentiel sur T3E, ordinateur de type MIMD à mémoire distribuée.

Le principe de l’implémentation est le suivant. On divise le maillage en barreaux, c’est à dire, en parallélépipèdes dont une direction contient tous les noeuds du maillage. Les barreaux sont répartis sur les processeurs. Chaque processeur alloué traite un et un seul barreau et n’a dans sa mémoire que la portion des variables propres au barreau (plus, éventuellement, celles des éléments de maillage frontière des barreaux voisins.)

Une direction est donc dégénérée puisqu’elle est complètement interne au processeur. Ceci est nécessaire pour les FFT 3D. La FFT 3D est décomposée en trois FFT 1D. On effectue la première FFT 1D dans la direction interne au processeur. Cela se fait donc sans échange entre processeurs. Le tableau est ensuite transposé suivant une direction. Cette fois, des échanges de parties de tableau entre processeurs sont nécessaires. La seconde FFT 1D est alors possible. On transpose le tableau suivant une deuxième direction pour pouvoir effectuer la troisième FFT 1D en local. Le tableau est alors re-transposé deux fois pour retrouver la configuration initiale.

Nous avons écrit la routine de calcul du noyau de telle manière qu’elle ne nécessite pas de communications inter-processeurs

5 Les résultats numériques :

Nous avons testé le code sur un cube, une sphère et, dans un contexte plus réel, d’un pôle de tête d’enregistrement.

Pour le cube et le pôle, nous avons comparé nos résultats avec des calculs fait avec le logiciel Flux3D. Ce logiciel permet de déterminer le potentiel scalaire associé au champ démagnétisant dans un matériau de géométrie quelconque pour des configurations d’aimantation constante par sous-domaines. La méthode de résolution [2, 3, 8] est basée sur la discrétisation de l’équation de Poisson $\Delta\phi = -4\pi\text{div}\vec{m}$ par éléments finis prismes d’ordre deux. Le problème du calcul dans la partie externe du matériau est résolu en faisant une transformation spaciale. Les points de l’extérieur sont ramenés dans un domaine fermé qui est lui-même maillé. Le champ démagnétisant est obtenu, en post-traitement, par différenciation du potentiel scalaire suivant les trois directions d’espace.

5.1 Cas test numéro 1 : aimantation uniforme dans un cube.

La géométrie choisie est un cube de 1 cm^3 présentant une aimantation parallèle à l'axe oz , de norme un.

Les courbes de la figure 5.1 ont été réalisées dans le contexte suivant :

- Code parallèle : maillage ayant $16 \times 16 \times 16 = 4096$ noeuds.
- Flux3D : maillage de 60347 noeuds d'ordre 2 (éléments finis P2).
- Pour un cube centré en $(0,0,0)$, on a tracé les trois composantes du champ démagnétisant suivant la droite $(y = -0,03125 \text{ cm} ; z = -0,03125 \text{ cm})$, ($j=7, k=7$ dans notre discrétisation).

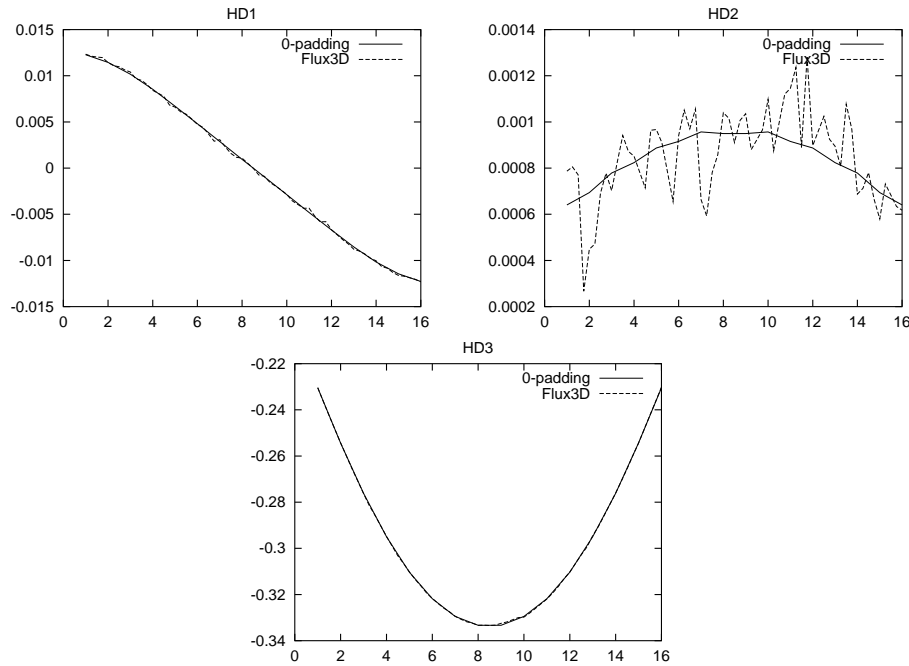


Figure 5.1 : Les trois composantes du champ démagnétisant suivant la droite $(y = -0,0625 \text{ cm} ; z = -0,0625 \text{ cm})$.
Comparaison avec Flux3D (courbe en pointillé).

Précisons d'abord que les oscillations sur la seconde composante de la courbe obtenue avec Flux3D sont négligeables par rapport à la norme du champ.

On note une bonne cohérence entre les résultats obtenus avec les deux codes. Les différences relatives sont en 10^{-2} ou 10^{-3} suivant les courbes.

5.2 Cas test numéro 2 : cube entouré d'une couche d'air

La géométrie choisie est un cube entouré d'air dans une boîte d'une dimension totale de 1 cm^3 . L'aimantation est parallèle à l'axe oz et de norme un.

5.2.1 Résultats avec un maillage $16 \times 16 \times 16$

De nouveau, on compare nos résultats avec ceux de Flux3D en utilisant les maillages suivants :

- Code parallèle : maillage $16 \times 16 \times 16 = 4096$ noeuds, 4 mailles d'air sur chaque côté.
- Flux3D : maillage de 60 347 noeuds d'ordre 2.
- Tracé suivant la droite ($x = -0,0625 \text{ cm}$; $y = -0,0625 \text{ cm}$).

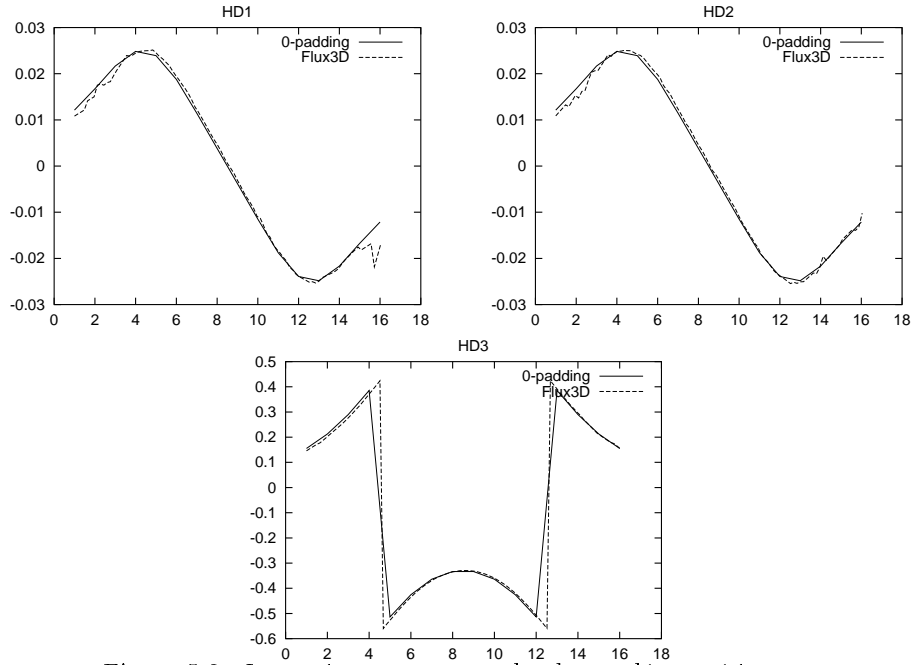


Figure 5.2 : Les trois composantes du champ démagnétisant.
Comparaison avec Flux3D (courbe en pointillée).

On observe, sur la troisième composante, un saut aux frontières du matériau. On note que les droites, au niveau du saut, ont une pente différente. La différence provient du fait que le maillage $16 \times 16 \times 16$ ne permet pas de calculer le champ démagnétisant aussi près du bord du matériau que le maillage utilisé par Flux3D.

De nouveau, on note une bonne cohérence entre les résultats obtenus avec les deux codes.

5.2.2 Résultats avec un maillage $64 \times 64 \times 64$

L'expérience est faite sur un maillage ayant beaucoup plus de noeuds que précédemment, $64 \times 64 \times 64$ au lieu de $16 \times 16 \times 16$, de façon à vérifier le comportement de l'algorithme sur un gros maillage.

On a tracé le champ démagnétisant dans deux plans, l'un horizontal coupant le matériau quasiment en son centre, l'autre vertical parallèle au plan xoz , proche de la surface arrière du cube. Les caractéristiques du maillage et du tracé sont les suivantes :

- Maillage $64 \times 64 \times 64 = 262\,144$ noeuds, 4 mailles d'air sur chaque côté.
- Coupe suivant le plan $z = 0,0078125$ cm, ($k=32$).

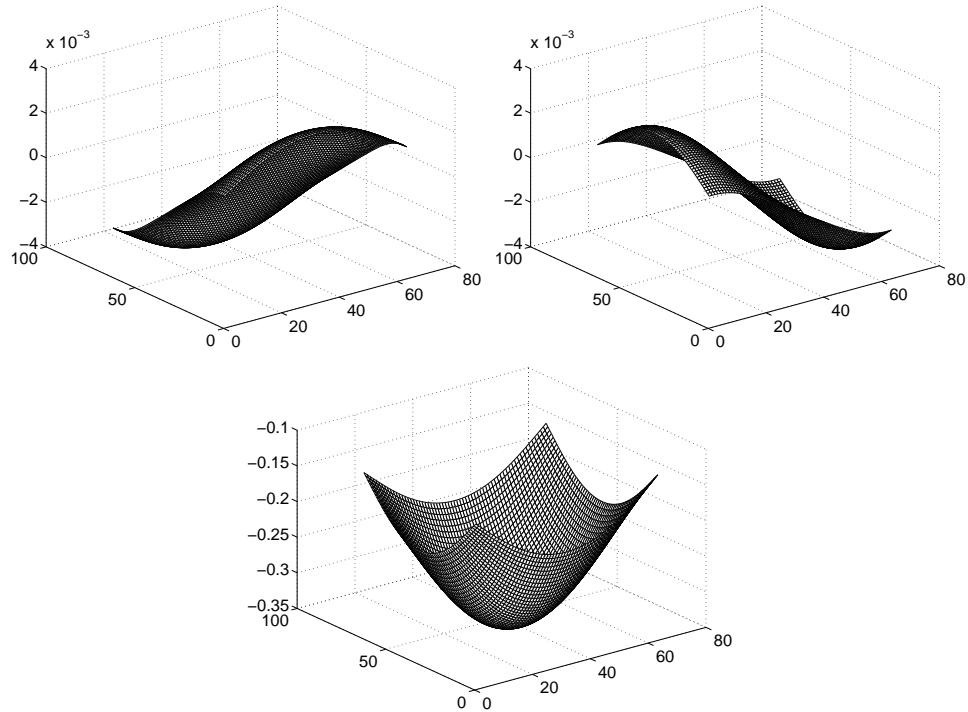


Figure 5.3 : Les trois composantes du champ démagnétisant suivant le plan $z = 0,0078125$ cm ($k=32$).

- Coupe suivant le plan $y = -0,4297$ cm, ($j=5$).

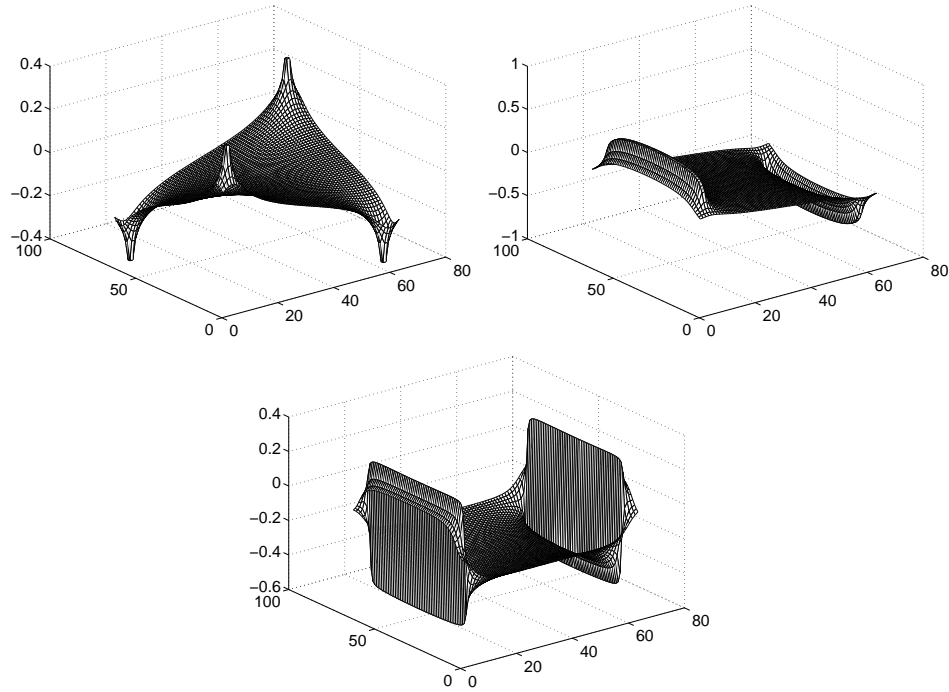


Figure 5.4 : Les trois composantes du champ démagnétisant suivant le plan $y = -0,4297$ cm, ($j=5$).

On note que les courbes sont bien lisses et ne présentent pas d'irrégularités même proche des bords du cube.

5.3 Cas test numéro 3 : sphère aimantée uniformément.

Nous avons ensuite calculé le champ démagnétisant dans une sphère aimantée uniformément, de norme un. Sa valeur est, dans ce cas particulier, connue. Elle est constante égale à $\vec{H}_D = -\vec{M}/3$.

5.3.1 Résultats

Deux maillages ont été retenus :

- un maillage $27 \times 27 \times 27 = 19\,683$ noeuds,
- un maillage $64 \times 64 \times 64 = 262\,144$ noeuds.

De par la symétrie de révolution du problème, les deux premières composantes du champ démagnétisant sont identiques. C'est ce qu'on observe sur les résultats.

On donne, ci-après, le champ suivant les deux coupes $y \approx 0$ et $z \approx 0$, pour les deux maillages.

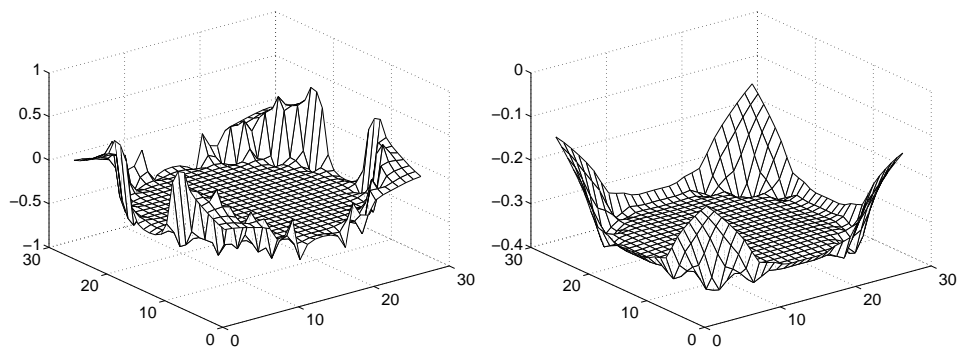


Figure 5.5 : La troisième composante du champ démagnétisant pour le maillage $27 \times 27 \times 27$ suivant le plan $y = 0$, à gauche, et $z = 0$, à droite.

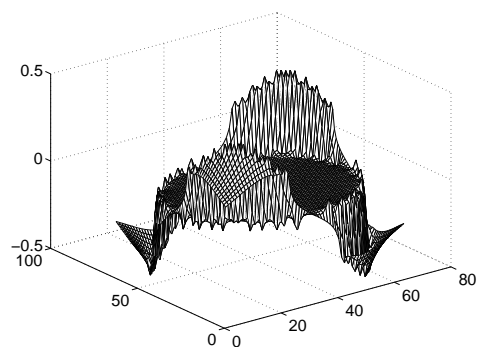


Figure 5.6 : Première et seconde composante du champ démagnétisant pour le maillage $64 \times 64 \times 64$ suivant le plan $y = 0, 008 \text{ cm}$.

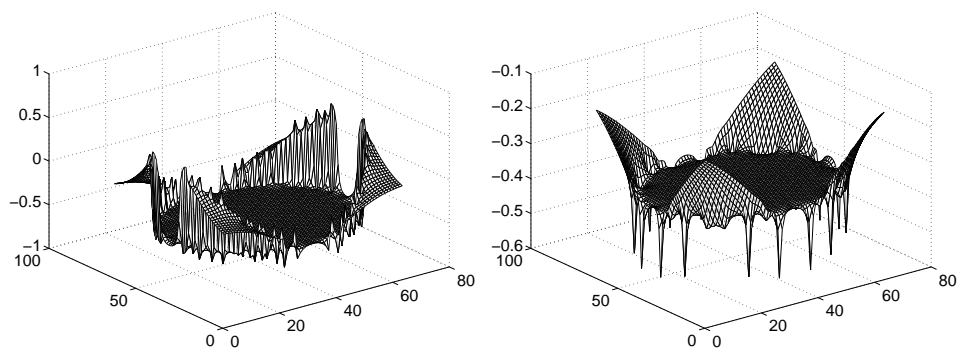


Figure 5.7: *Troisième composante du champ démagnétisant pour le maillage $64 \times 64 \times 64$ suivant le plan $y = 0,008$ cm, à gauche, et $z = 0,008$ cm à droite.*

On a tracé les courbes de niveau dans les mêmes situations.

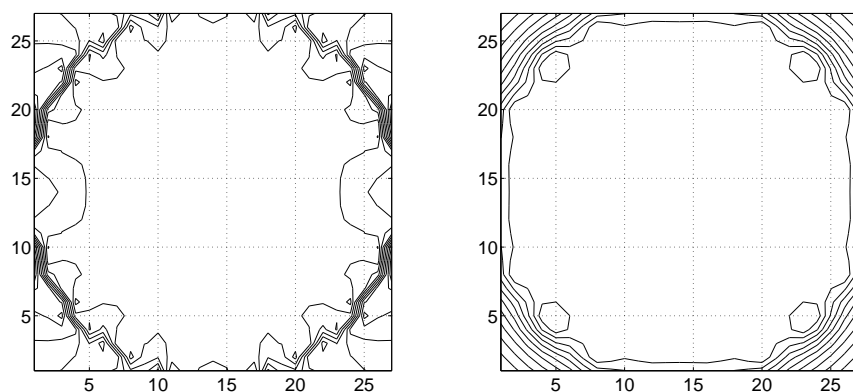


Figure 5.8: *La troisième composante du champ démagnétisant pour le maillage $27 \times 27 \times 27$ suivant le plan $y = 0$, à gauche, et $z = 0$, à droite. Courbe de niveau.*

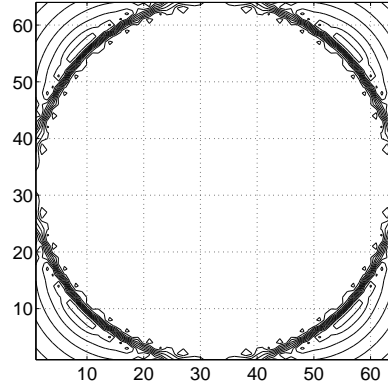


Figure 5.9 : Première ou seconde composante du champ démagnétisant pour le maillage $64 \times 64 \times 64$ suivant le plan $y = 0,008 \text{ cm}$. Courbe de niveau.

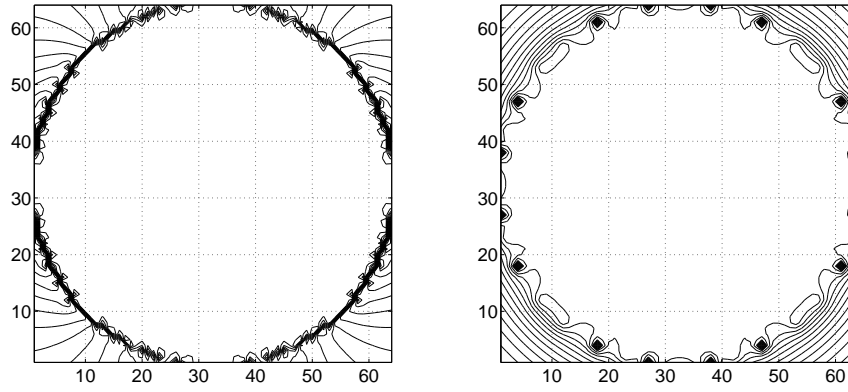


Figure 5.10 : Troisième composante du champ démagnétisant pour le maillage $64 \times 64 \times 64$ suivant le plan $y = 0,008 \text{ cm}$, à droite, et $z = 0,008 \text{ cm}$ à gauche. Courbe de niveau.

Les figures ci-dessus montre que le champ calculé est bien constant et de valeur approximativement égale à $-\vec{M}/3$ dans la sphère dès qu'on s'éloigne de la zone de cubes frontaliers. On note des pics sur la bordure.

Nous avons calculé les erreurs relatives en norme L^1 , L^2 et L^∞ sur l'ensemble des cubes dont le centre est dans la sphère. Nous donnons figure 5.11.a l'erreurs en fonction de la racine cubique du nombre d'éléments du maillage.

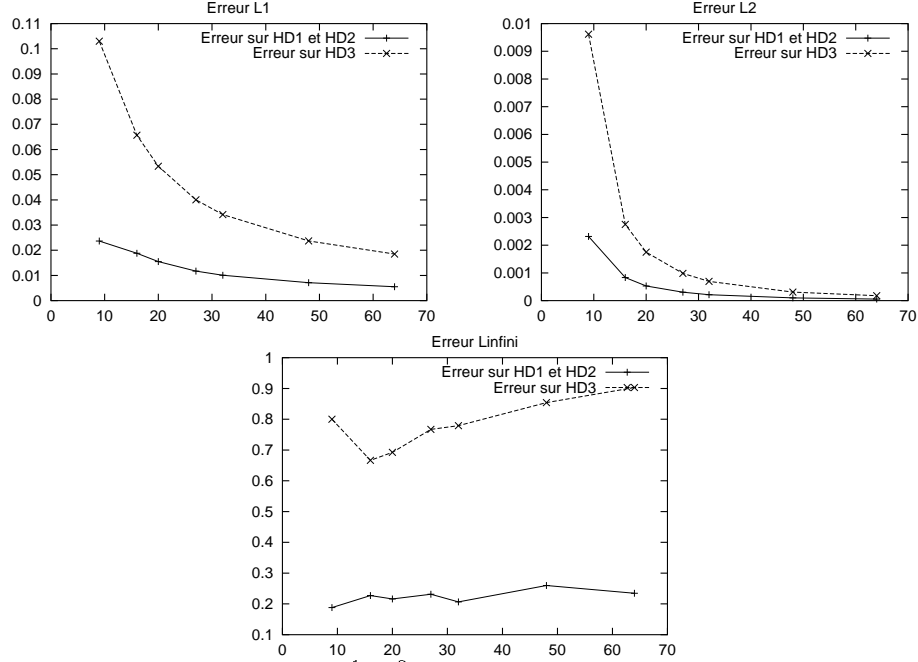


Figure 5.11.a : Erreurs relatives L^1 , L^2 et L^∞ en fonction du maillage. Erreurs sur la composante 3 en pointillé.

Les erreurs relatives L^1 et L^2 décroissent lorsque la taille du maillage croît. Pour un maillage $64 \times 64 \times 64$, elles ne sont plus que de 0,5% sur les composantes x et y du champ et 2% sur la composante z en norme L^1 , et, respectivement, de 0,006% et 0,02% en norme L^2 . Par contre, l'erreur relative en norme du sup ne décroît pas. Elle est d'environ 20% sur la première et la seconde composante, et varie entre 65% et 90% sur la troisième composante. Cela traduit la présence des pics figure 7. Ce résultat est à pondérer par le fait qu'on calcule un champ moyen par sous-cube. Pour les cubes comprenant une partie d'air et une partie de matériau, le calcul de l'erreur est donc faux. Figure 5.11.b, on donne les tracés des erreurs dans les différentes normes lorsque l'on ne prend pas en compte ces cubes. On note qu'à

nouveau l'erreur L^∞ ne décroît pas avec le maillage mais qu'elle n'est plus que de 3 à 7% pour la première et la deuxième composante du champ, et de 11 à 18% pour la troisième.

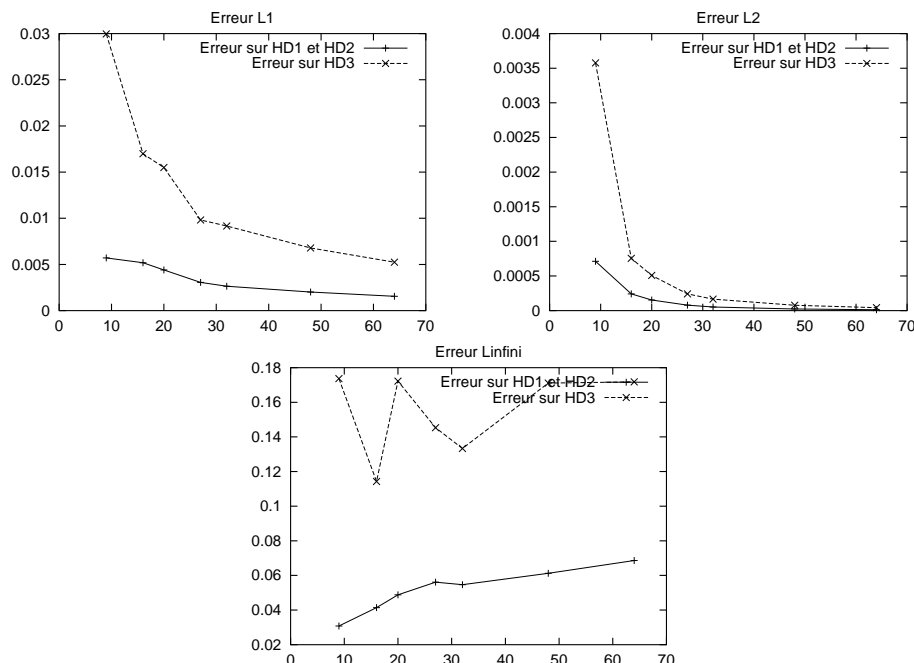


Figure 5.11.b: Erreurs relatives L^1 , L^2 et L^∞ en fonction du maillage. Erreurs sur la composante 3 en pointillé.

5.3.2 Temps de calcul

Nous donnons, dans les tableaux 5.1 et 5.2, respectivement, les temps CPU du calcul sur Cray T3E des éléments de la matrice noyau et de celui du champ pour trois maillages différents, les maillages $16 \times 16 \times 16$, $32 \times 32 \times 32$ et $64 \times 64 \times 64$ en fonction du nombre de processeurs.

Rappelons que, lorsqu'on utilise 4 processeurs, seul 1 contient la structure en elle-même. Les 3 autres sont dédiés au stockage des 0 pour la technique de "0-padding". Le premier tableau donne les temps de calcul du noyau, le second, ceux du calcul du champ lorsque noyau et aimantation sont stockés. Le troisième donne le facteur d'accélération lorsqu'on double le nombre de processeurs pour un maillage donné.

À titre indicatif, le plus gros maillage qu'on ait pu testé sur une station SUN Ultra Sparc 170 Mhz avait $24 \times 24 \times 24$ éléments. Les temps de calcul des éléments du noyau et de l'algorithme de "0-padding" étaient, respectivement, de 12 et 11 secondes pour un maillage $16 \times 16 \times 16$ et de 42 et 41 secondes pour un maillage $24 \times 24 \times 24$. Ces temps sont beaucoup

inférieurs sur le Cray T3E puisqu'ils sont, respectivement, de 0,44 seconde et 0,68 seconde pour le maillage $24 \times 24 \times 24$, en utilisant 4 processeurs.

Maillage	4 proc.	8 proc.	16 proc.	32 proc.
$16 \times 16 \times 16$	0.143	7.98E-2	4.28E-2	2.27E-2
$32 \times 32 \times 32$	1.127	0.555	0.285	0.159
$64 \times 64 \times 64$	-	-	2.192	1.114

Table 5.1 : *Temps CPU de calcul du noyau (en secondes).*

Maillage	4 proc.	8 proc.	16 proc.	32 proc.
$16 \times 16 \times 16$	0.256	0.14	7.32E-2	4.66E-2
$32 \times 32 \times 32$	1.815	0.945	0.503	0.274
$64 \times 64 \times 64$	-	-	3.952	2.00

Table 5.2 : *Temps CPU de calcul du champ (en secondes).*

	Calcul du noyau			Calcul du champ		
	4 \rightarrow 8 p.	8 \rightarrow 16 p.	16 \rightarrow 32 p.	4 \rightarrow 8 p.	8 \rightarrow 16 p.	16 \rightarrow 32 p.
$16 \times 16 \times 16$	1.79	1.86	1.885	1.83	1.91	1.6
$32 \times 32 \times 32$	2.03	1.95	1.79	1.92	1.89	1.84
$64 \times 64 \times 64$	-	-	1.967	-	-	1.98

Table 5.3 : *Facteurs d'accélération.*

Le tableau 5.3 donne les facteurs d'accélération lorsqu'on double le nombre de processeurs utilisés. Ils varient entre 1,8 et 2 indiquant un bon degré de parallélisme du code. C'était prévisible pour le calcul du noyau puisqu'il ne nécessite pas d'échanges de messages. C'est plus étonnant pour le calcul du champ puisque la procédure de calcul des FFT 3D met en jeu des communications inter-processeurs. Elle présente donc un bon degré de parallélisme.

5.4 Cas test numéro 4 : maillage de la sphère en éléments parallélépipédiques

Nous avons testé notre code avec des maillages de la sphère non plus en sous-cubes mais en sous-parallélépipèdes. Les erreurs sur la solution restent du même ordre de grandeur avec la même remarque que ci-dessus pour l'erreur L^∞ et les éléments de la bordure.

Maillage	Nbre de noeuds intérieurs	Erreur L^1	Erreur L^2	Erreur L^∞
$16 \times 16 \times 8$ HD1	1104	2.48E-2	1.26E-3	0.150
HD2	1104	2.48E-2	1.26E-3	0.150
HD3	1104	9.50E-2	4.75E-3	0.679
$32 \times 32 \times 16$ HD1	8664	1.42E-2	3.69E-4	0.232
HD2	8664	1.42E-2	3.69E-4	0.232
HD3	8664	4.80E-2	1.23E-3	0.920
$48 \times 48 \times 24$ HD1	29056	1.0E-2	1.70E-4	0.224
HD2	29056	1.0E-2	1.70E-4	0.224
HD3	29056	3.37E-2	5.55E-4	0.950
$24 \times 48 \times 48$ HD1	29056	1.01E-2	1.70E-4	0.224
HD2	29056	8.44E-3	1.43E-4	0.219
HD3	29056	3.03E-2	4.91E-4	0.746
$64 \times 64 \times 32$ HD1	68928	7.63E-3	9.66E-5	0.222
HD2	68928	7.63E-3	9.66E-5	0.222
HD3	68928	2.49E-2	3.12E-4	1.001
$64 \times 64 \times 128$ HD1	274400	4.55E-3	3.61E-5	0.233
HD2	274400	4.55E-3	3.6E-5	0.233
HD3	274400	1.57E-2	1.2E-4	0.827

Table 5.4 : Erreurs relatives pour un maillage en sous-parallélépipèdes

On ne note pas vraiment de différence suivant le rapport d'aspect des éléments du maillage : les erreurs relatives L^1 et L^2 sont du même ordre pour les maillages $48 \times 48 \times 24$ et $24 \times 48 \times 48$.

5.5 Cas test numéro 5 : aimantation uniforme dans un pôle de tête de lecture.

Nous avons également calculé le champ démagnétisant dans un pôle de tête d'enregistrement. Nous donnons figure 5.12 une vue de dessus de ce pôle. Dans la troisième direction, il

est plat et d'épaisseur constante. L'aimantation est prise uniforme dirigée suivant l'axe oy et de norme un. Le pôle rentre dans une boîte de taille minimum $140\mu m \times 100\mu m \times 7\mu m$.

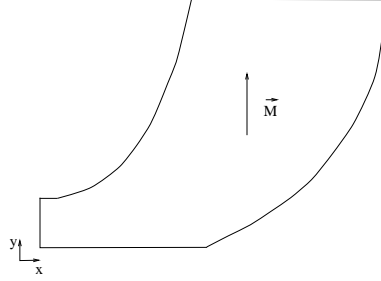


Figure 5.12 : *Pôle d'une tête d'enregistrement vidéo.*

Les calculs ont été fait avec les maillages suivants :

- Code parallèle : maillage $100 \times 72 \times 5 = 36\,000$ noeuds.
- Flux3d : maillage de 34 917 noeuds d'ordre 2 (éléments finis P2).

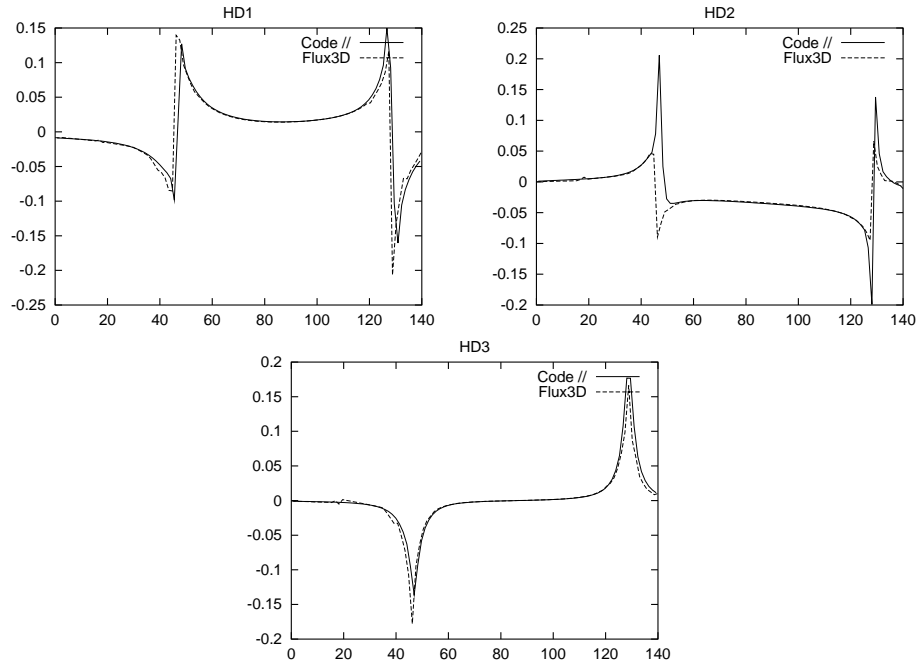


Figure 5.13 : *Champ démagnétisant. Tracé suivant la droite ($y = 56,25\mu m$, $z = 0,7\mu m$).*

Mis à part les deux régions comprenant l'interface matériau-air, on a une très bonne similitude entre les deux courbes pour chaque composante.

Figures 5.14 et 5.15, nous donnons les représentations 3D des deux premières composantes du champ démagnétisant obtenues avec notre code dans le plan horizontal passant au centre du matériau, ainsi que les tracés d'isovaleurs correspondants. La troisième composante du champ est approximativement nulle.

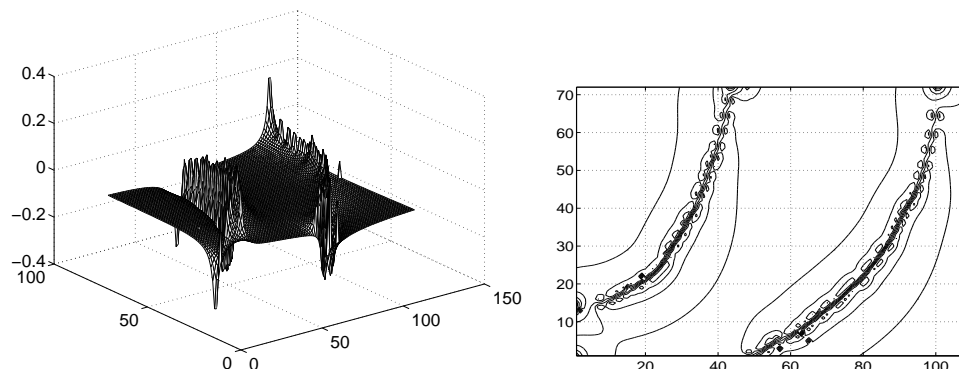


Figure 5.14: *Première composante du champ démagnétisant obtenue avec notre code.*

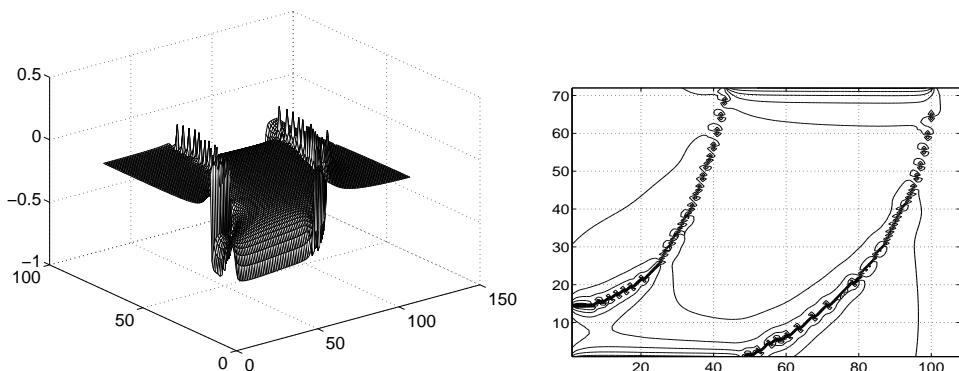


Figure 5.15: *Deuxième composante du champ démagnétisant obtenue avec notre code.*

Sur les schémas des courbes de niveau, on voit bien la tête se dessiner avec, à l'intérieur, un champ constant s'opposant à l'aimantation.

Nous donnons, figure 5.16, les résultats obtenus avec Flux3D sur la même coupe que précédemment pour un pôle en symétrie miroir d'axe ox . On trouve des tracés similaires à ceux des figures précédentes. L'interface matériau-air est une crête dans les résultats de Flux3D. Celle-ci est moins régulière avec des pics dans ceux obtenus avec le code parallèle.

Ceci peut s'expliquer par le fait que la frontière étant moins bien prise en compte dans la méthode des transformées de Fourier.

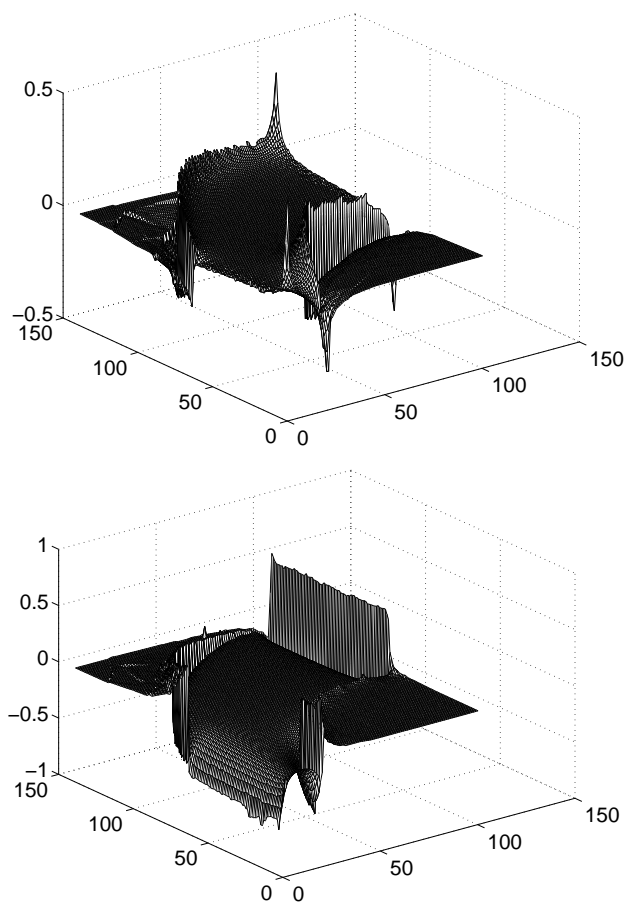


Figure 5.16 : Première et deuxième composante du champ démagnétisant obtenue avec *Flux3D*.

6 Conclusion

Nous avons implémenté en séquentiel puis en parallèle, et testé l'algorithme de "0-padding" pour le calcul du champ démagnétisant dans un matériau ferromagnétique. Il permet, grâce au calcul d'un produit de convolution dans l'espace des fréquences en utilisant des transformées de Fourier discrètes, un gain de temps substantiel par rapport au calcul direct de ce produit. En effet, ce coût est en $O(N \log N)$ au lieu de $O(N^2)$ pour le calcul direct, si N est le nombre d'éléments du maillage. Le stockage est en $O(N)$ au lieu de $O(N^2)$ si on utilise une grille irrégulière.

Cet algorithme a été utilisé, dans un premier temps, pour calculer le champ dans un cube. Les résultats sont comparés avec des valeurs obtenues avec le logiciel Flux3D pour la même géométrie. Ils sont du même ordre de grandeur.

Le passage en domaines de géométrie quelconque a consisté en une adaptation du code précédent. Le matériau est plongé dans un parallélépipède d'air, la variable d'aimantation est mise à zéro quand le centre de la maille est situé à l'extérieur du matériau. Ceci conduit nécessairement à faire une approximation des frontières du matériau.

Nous avons testé ce code sur une sphère aimantée uniformément suivant oz . Dans ce cas, on connaît valeur analytique du champ. On l'a comparée aux résultats numériques. Les erreurs relatives L^1 et L^2 décroissent lorsque la taille du maillage croît. Pour un maillage $64 \times 64 \times 64$, elles ne sont plus que de 0,5% sur les composantes x et y du champ et 2% sur la composante z , en norme L^1 , et, respectivement, 0,006% et 0,02% en norme L^2 . L'erreur relative en norme du sup, par contre, ne décroît pas avec le nombre de mailles. Elle varie entre 3 et 7% pour la première et la seconde composante, et entre 11% et 18% pour la troisième composante. On a noté la présence de pics sur la bordure de la sphère.

Les calculs sur des maillages en éléments parallélépipédiques donnent des erreurs du même ordre de grandeur.

Remerciements: Nous remercions Marc AID, LETI, CEA Grenoble, qui a effectué les calculs avec le logiciel Flux3D.

7 Annexe : calcul des coefficients d'interaction

7.1 Plaques parallèles

Il s'agit de calculer

$$W^{xyxy}(P, Q, R) = \int_{-b}^b \int_{-a}^a \int_{-b}^b \int_{-a}^a \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2}} dx dy dx' dy'$$

où $\xi = P - x + x'$, $\eta = Q - y + y'$, $\zeta = R$ et P, Q et R représentent la distance entre les centres des deux plaques dans les directions ox , oy et oz , respectivement.

Soit $r = \sqrt{\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2}$. Pour chaque intégration, on précise si le résultat a été obtenu à l'aide :

- (a) du logiciel Maple,
- (b) de formules données dans l'article [13],
- (c) de tables d'intégration [15],
- (d) du logiciel Mathematica.

– 1 - Intégration en x :

$$\int \frac{1}{r} dx = {}^{(a)} - \ln(\xi + r)$$

– 2 - Intégration en y :

$$\begin{aligned} (1) = - \int \ln(\xi + r) dy &= {}^{(b)} \xi \ln(\eta + r) + \eta \ln(\xi + r) - \zeta \arctan\left(\frac{\xi\eta}{\zeta r}\right) - \eta \\ &\quad + \zeta \arctan\left(\frac{\eta}{\zeta}\right) - \xi + \zeta \arctan\left(\frac{\xi}{\zeta}\right) \end{aligned}$$

– 3 - Intégration en x' :

$$\begin{aligned} \int \xi \ln(\eta + r) dx' &= {}^{(b)} \frac{1}{2}(\xi^2 + \zeta^2) \ln(\eta + r) + \frac{1}{2}\eta r - \frac{1}{4}r^2 \\ \int \ln(\xi + r) dx' &= {}^{(c)} \xi \ln(\xi + r) - r \\ \int \arctan\left(\frac{\xi\eta}{\zeta r}\right) dx' &= {}^{(b)} \xi \arctan\left(\frac{\xi\eta}{\zeta r}\right) + \zeta \ln(\eta + r) - \frac{1}{2}\zeta \ln(\xi^2 + \zeta^2). \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} \int (1) dx' &= \frac{1}{2}(\xi^2 - \zeta^2) \ln(\eta + r) - \frac{1}{4}r^2 + \xi \eta \ln(\xi + r) - \xi \zeta \arctan\left(\frac{\xi\eta}{\zeta r}\right) \\ &\quad - \frac{1}{2}\eta r + \frac{1}{2}\zeta^2 \ln(\xi^2 + \zeta^2) - \xi \eta + \xi \zeta \arctan\left(\frac{\eta}{\zeta}\right) \end{aligned}$$

– 4 - Intégration en y' :

$$\begin{aligned} \int \eta r dy' &= {}^{(a)} \frac{1}{3}r^3 \\ \int \arctan\left(\frac{\eta}{\zeta}\right) dy' &= {}^{(a)} \eta \arctan\left(\frac{\eta}{\zeta}\right) - \frac{1}{2}\zeta \ln(\eta^2 + \zeta^2) + \zeta \ln(\zeta) \end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned} \iiint \frac{1}{r} dx dy dx' dy' &= \frac{1}{2}\xi(\eta^2 - \zeta^2) \ln(r + \xi) + \frac{1}{2}\eta(\xi^2 - \zeta^2) \ln(r + \eta) \\ &\quad + \frac{1}{6}(3\zeta^2 - r^2)r - \xi\eta\zeta \arctan\left(\frac{\xi\eta}{\zeta r}\right) \\ &\quad + \xi\eta\zeta \left(\arctan\left(\frac{\xi}{\zeta}\right) + \arctan\left(\frac{\eta}{\zeta}\right) \right) \\ &\quad - (\xi + \eta) \left(\frac{1}{4}r^2 + \frac{1}{2}\xi\eta - \frac{1}{2}\zeta^2 \ln(\zeta) \right) \end{aligned}$$

Certains termes du membre de droite de l'égalité ci-dessus se simplifient lors du calcul de la primitive entre les bornes, si bien que l'on retrouve le résultat du paragraphe (2).

7.2 Plaques orthogonales

Il s'agit de calculer

$$W^{xyyz}(P, Q, R) = \int_{-c}^c \int_{-b}^b \int_{-b}^b \int_{-a}^a \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2}} dx dy dy' dz'$$

où, cette fois, $\xi = P - x$, $\eta = Q - y + y'$, $\zeta = R + z$. Comme précédemment, P, Q et R représentent la distance entre les centres des deux plaques dans les directions ox , oy et oz , respectivement.

Soit, de même que précédemment, $r = \sqrt{\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2}$.

– 1 - Intégration en x :

$$\int \frac{1}{r} dx = {}^{(a)} -\ln(\xi + r)$$

– 2 - Intégration en y :

$$(2) = -\int \ln(\xi + r) dy = {}^{(b)} \xi \ln(\eta + r) + \eta \ln(\xi + r) - \zeta \arctan\left(\frac{\xi\eta}{\zeta r}\right) - \eta + \zeta \arctan\left(\frac{\eta}{\zeta}\right)$$

– 3 - Intégration en y' . On dispose des égalités suivantes :

$$\begin{aligned} \int \ln(\eta + r) dy' &= {}^{(c)} \eta \ln(\eta + r) - r \\ \int \eta \ln(\xi + r) dy' &= {}^{(b)} \frac{1}{2}(\eta^2 + \zeta^2) \ln(\xi + r) + \frac{1}{2}\xi r - \frac{1}{4}r^2 \\ \int \arctan\left(\frac{\xi\eta}{\zeta r}\right) dy' &= {}^{(b)} \eta \arctan\left(\frac{\xi\eta}{\zeta r}\right) + \zeta \ln(\xi + r) - \frac{1}{2}\zeta \ln(\eta^2 + \zeta^2). \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} \int (2) dy' &= \frac{1}{2}(\eta^2 - \zeta^2) \ln(\xi + r) - \frac{1}{2}\xi r + \xi \eta \ln(\eta + r) - \eta \zeta \arctan\left(\frac{\xi\eta}{\zeta r}\right) \\ &\quad - \frac{1}{4}r^2 - \frac{1}{2}\eta^2 - 2\zeta \ln(\zeta) + \eta \zeta \arctan\left(\frac{\eta}{\zeta}\right) \end{aligned}$$

– 4 - Intégration en z' . On a :

$$\begin{aligned} \int \zeta^2 \ln(\xi + r) dz' &= {}^{(d)} \frac{1}{3}\eta^2 \zeta - \frac{1}{9}\zeta^3 + \frac{1}{6}\xi \zeta r - \frac{1}{3}\eta^3 \arctan\left(\frac{\zeta}{\eta}\right) \\ &\quad + \frac{1}{3}\eta^3 \arctan\left(\frac{\xi\zeta}{\eta r}\right) - \frac{1}{6}\xi(\xi^2 + 3\eta^2) \ln(\zeta + r) + \frac{1}{3}\zeta^3 \ln(\xi + r) \\ &\quad - \int \zeta \arctan\left(\frac{\xi\eta}{\zeta r}\right) dz' = {}^{(d)} \frac{1}{2}\xi^2 \arctan\left(\frac{\eta\zeta}{\xi r}\right) + \frac{1}{2}\eta^2 \arctan\left(\frac{\xi\zeta}{\eta r}\right) \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{2}\zeta^2 \arctan\left(\frac{\xi\eta}{\zeta r}\right) - \xi\eta \ln(\zeta + r)$$

$$\int \zeta \arctan\left(\frac{\eta}{\zeta}\right) dz' \stackrel{(a)}{=} \frac{1}{2}\zeta^2 \arctan\left(\frac{\eta}{\zeta}\right) - \frac{1}{2}\eta^2 \arctan\left(\frac{\zeta}{\eta}\right) + \frac{1}{2}\eta\zeta.$$

D'où

$$\begin{aligned} \iiint \frac{1}{r} dx dy dy' dz' &= \xi\eta\zeta \ln(\eta + r) + \frac{1}{6}\xi(3\eta^2 - \xi^2) \ln(\zeta + r) \\ &+ \frac{1}{6}\zeta(3\eta^2 - \zeta^2) \ln(\xi + r) \\ &- \frac{1}{6}\eta \left(\eta^2 \arctan\left(\frac{\xi\zeta}{\eta r}\right) + 3\xi^2 \arctan\left(\frac{\eta\zeta}{\xi r}\right) + 3\zeta^2 \arctan\left(\frac{\xi\eta}{\zeta r}\right) \right) \\ &- \frac{1}{3}r\xi\zeta - \xi\eta\zeta + \frac{1}{6}\eta^3 \arctan\left(\frac{\zeta}{\eta}\right) + \frac{1}{12}\eta\zeta^2 \arctan\left(\frac{\eta}{\zeta}\right) \\ &+ \eta\xi^2 \arctan\left(\frac{\zeta}{\xi}\right) - \frac{1}{36}\zeta^3 - \frac{11}{12}\eta^2\zeta - \frac{1}{4}\xi^2\zeta \end{aligned}$$

On retrouve, comme dans le cas des plaques parallèles, que certains termes de la formule ci-dessus se simplifient lors du calcul final.

Références

- [1] D. V. Berkov, K. Ramstöck, & A. Hubert, “*Solving micromagnetic problems: Towards an optimal numerical method*”, Phys. Stat. Sol. A, 137, 207-225, 1993.
- [2] X. Brunotte, G. Meunier, and J. F. Imhoff, “*Finite element modeling of unbounded problems using transformations: a rigorous, powerfull and easy solution*”, IEEE Trans. Magn., vol. 28, pp. 1663-1666, Mar. 1992.
- [3] Q. Chen, and A. Konrad, “*A Review of Finite Element Open Boundary Techniques for Static and Quasi-Static Electromagnetic Problems*”, IEEE Trans. Magn., vol. 33, no 1, pp. 663-676, Jan. 1997.
- [4] J. W. Eastwood and D. R. K. Brownrigg, “*Remarks on the Solution of the Poisson’s Equation for Isolated Systems*” J. Comp. Physics 32, 24-38, 1979.
- [5] K. Fabian, A. Kirchner, W. Williams, F. Heider, T. Liebl, and A. Hubert, “*Three-dimensional micromagnetic calculations for magnetite using FFT*”, Geophys. J. mt. 124, 99-104, 1996.
- [6] N. Hayashi, K. Saito, and Y. Nakatani, “*Calculation of Demagnetizing Field Distribution Based on Fast Fourier Transform of Convolution*, Jpn. J. Appl. Phys., Vol. 35 (1996) pp. 6065-6073.

- [7] R. W. Hockney, *Methods Comput. Phys.* 9, 136-210, 1970.
- [8] J. F. Imhoff, G. Meunier, and J. C. Sabonnadière, "*Finite element modeling of open boundary problems*", *IEEE Trans. Magn.*, vol. 26, pp 588-591, Mar. 1990.
- [9] A. J. Newell, W. Williams, and D. J. Dunlop, "*A Generalization of the demagnetizing Tensor for Nonuniform Magnetization*", *J. geophys. Res.*, 98, 9551-9555, 1993.
- [10] G. N. Patterson, "*A Numerical Investigation of Magnetic Domain Wall Motion*", PhD thesis, Boston University, 1993.
- [11] W. H. Press, P. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterly, "*Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing (Fortran Version)*," Cambridge University Press, Cambridge 1989.
- [12] K. Ramstok, T. Liebl, & A. Hubert, "*Optimizing stray field and exchange energy calculations in finite element micromagnetics*", *J. Magn. Magn. Mat.*, 135, 97-110, 1994.
- [13] P. Rhodes and G. Rowlands, "*Demagnetising Energies of Uniformly Magnetised Rectangular Blocks*", *Proc. Leeds Philos. Lit. Soc. Sci. Sect.*, 6, 191-210, 1954.
- [14] M. E. Shabes and A. Aharoni, "*Magnetostatic Interaction Fields for Three-Dimensional Array of Ferromagnetic Cubes*", *IEEE Trans. Magn.*, mag-23, n0 6, 1987.
- [15] R. Spiegel, "*Mathematical Handbook of formulas and tables*", *Shaum's Outline Series*, 1968.
- [16] A. Viallix, "*Simulation de la structure de parois dans un matériau magnétique*", thèse de l'INPG, février 1990.
- [17] S. W. Yuan, "*Micromagnetics of Domains and Walls in Soft Ferromagnetic Materials*", PhD Thesis, University of California, San Diego, 1992.
- [18] S. W. Yuan and H. Neal Bertram "*Fast Adaptive Algorithms for Micromagnetics*", *IEEE Trans. Magn.* 28, 2031, 1992.



Unité de recherche INRIA Lorraine, Technopôle de Nancy-Brabois, Campus scientifique,
615 rue du Jardin Botanique, BP 101, 54600 VILLERS LÈS NANCY
Unité de recherche INRIA Rennes, Irisa, Campus universitaire de Beaulieu, 35042 RENNES Cedex
Unité de recherche INRIA Rhône-Alpes, 655, avenue de l'Europe, 38330 MONTBONNOT ST MARTIN
Unité de recherche INRIA Rocquencourt, Domaine de Voluceau, Rocquencourt, BP 105, 78153 LE CHESNAY Cedex
Unité de recherche INRIA Sophia-Antipolis, 2004 route des Lucioles, BP 93, 06902 SOPHIA-ANTIPOLIS Cedex

Éditeur
INRIA, Domaine de Voluceau, Rocquencourt, BP 105, 78153 LE CHESNAY Cedex (France)
<http://www.inria.fr>
ISSN 0249-6399